



TITLE:

13.界面の熱的揺らぎとドロプレットの寿命(「パターン形成、運動及びその統計」研究会,研究会報告)

AUTHOR(S):

中西, 秀

CITATION:

中西, 秀. 13.界面の熱的揺らぎとドロプレットの寿命(「パターン形成、運動及びその統計」研究会,研究会報告). 物性研究 1990, 54(4): 300-309

ISSUE DATE:

1990-07-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/94107>

RIGHT:

13. 界面の熱的揺らぎとドロプレットの寿命

慶大理工

中西 秀

1 序

秩序状態での熱的揺らぎは、無秩序状態でのそれと非常に異なる。例えば、離散的な対称性が破れたイジング強磁性体では、大きさが相関長程度の通常の揺らぎに加えて、系が局所的に他の部分と異なる平衡状態にあるようなドロプレット型の揺らぎも、時として生ずる。このようなドロプレット揺らぎはめったに生じないが、一度現れると、それを消滅させるための駆動力が表面にしか働かないために、なかなか消えない。このような長寿命の揺らぎは、系の動的性質になんらかの影響を与えると考えられる。

最近いくつかの仕事によって、¹⁻⁵秩序状態における動的イジング模型(グラバー模型)のスピン自己相関関数、

$$C(t) = \langle S_i(t) S_i(0) \rangle - \langle S_i \rangle^2 \quad (1)$$

が調べられた。モンテカルロシミュレーションの結果は、明らかに、空間次元 $d = 2, 3, 4$ いずれでも指数 $\beta = 0.33, 0.4, 0.5$ の引き延ばされた指数関数

$$C(t) \sim \exp(-ct^\beta) \quad (2)$$

のように緩和するように見える。これは、無秩序相での指数関数型緩和と大きく異なる。この異常にゆっくりとした緩和は、長寿命のドロプレット揺らぎからくるものと思われるが、ドロプレットの変形効果を見捨てた単純な独立ドロプレット模型に基づいた計算は、シミュレーションとは異なる指数、即ち $\beta = 1/2, 1, 1$ を与える。^{1,4}

独立ドロプレット近似の主な仮定は、(1) t の大きな領域では、 $C(t)$ への寄与はそれぞれのドロプレットの独立な寄与の和となる。(独立ドロプレットの仮定) (2) 主に寄与するドロプレットは、その中心が注目しているスピンのあたりにあり、 $C(t)$ への寄与は消滅したときに終る。(3) 変形効果は、ドロプレットの生き残り確率に本質的な影響を及ぼさない。(球形ドロプレットの仮定)

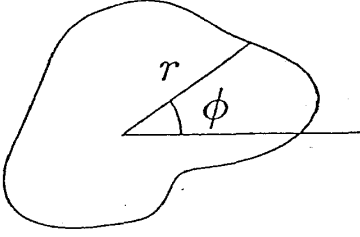


図 1: 変形したドロプレットにたいする極座標。

これらの仮定より導かれた β はモンテカルロシミュレーションによるものと一致しないので、そのいくつかは少なくともシミュレーションされている時間領域で破れているに違いない。今回の報告では、第三番目の仮定 (球形ドロプレットの仮定) を、二次元の場合について界面の方程式を解析することによって、詳しく調べる。

2 界面の運動方程式

二次元の界面の運動は、

$$v_{\perp}(s, t) = -\Gamma K(s, t) + \xi(s, t) \quad (3)$$

で記述される。⁶ ここで、 v_{\perp} は界面に垂直方向の界面の動く速さ、 Γ は運動係数、 K は界面の局所曲率である。記号 t は時間、 s は界面に沿った自然座表である。 ξ は界面に働くランダム力で、ガウス型の白色雑音で近似し、相関は、

$$\langle \xi(s, t) \xi(s', t') \rangle = 2 \frac{\Gamma T}{\sigma} \delta(s - s') \delta(t - t'), \quad (4)$$

で与えられる。ここで、 $\langle \dots \rangle$ はアンサンブル平均、 T は温度、 σ は低温での表面張力を表す。

ドロプレットは大きくは変形していないと仮定し、その界面は局座標を用いて一価関数、

$$r = r(\phi, t) \quad (5)$$

で表されとする。(図 1) すると式 (3)、(4) は

$$\frac{r}{\sqrt{r^2 + r'^2}} \frac{\partial r}{\partial t} = -\Gamma \frac{r^2 - r r'' + 2r'^2}{(r^2 + r'^2)^{3/2}} + \frac{\eta(\phi, t)}{(r^2 + r'^2)^{1/4}} \quad (6)$$

$$\langle \eta(\phi, t) \eta(\phi', t') \rangle = 2 \frac{\Gamma T}{\sigma} \delta(\phi - \phi') \delta(t - t'), \quad (7)$$

となる。ここで、 $r' = \partial r(\phi, t)/\partial \phi$ および、

$$\eta(\phi, t) \equiv \xi(\phi, t)(r^2 + r'^2)^{1/4}。 \quad (8)$$

平均半径 $r_0(t)$ 及びそれからのずれ $\delta r(\phi, t)$ を

$$r(\phi, t) \equiv r_0(t) + \delta r(\phi, t); \quad \int_0^{2\pi} \delta r(\phi, t) d\phi = 0 \quad (9)$$

により導入し、ずれの比 $x(\phi, t)$ を

$$x(\phi, t) \equiv \delta r(\phi, t)/r_0(t) \quad (10)$$

で定義する。すると式 (6) は、

$$\begin{aligned} \frac{\partial r}{\partial t} = & -\frac{\Gamma (1+x)^2 - (1+x)x'' + 2x'^2}{r_0 (1+x)\{(1+x)^2 + x'^2\}^{1/4}} \\ & + \frac{\eta}{\sqrt{r_0}} \frac{\{(1+x)^2 + x'^2\}^{1/4}}{1+x}。 \end{aligned} \quad (11)$$

となる。

3 $x = 0$ のまわりでの展開

式 (11) の右辺は $x \sim 0$ で

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(r_0(1+x)) = & -\frac{\Gamma}{r_0}(1-x-x''+x^2+2xx''+x'^2+....) \\ & + \frac{\eta}{\sqrt{r_0}}(1-\frac{1}{2}x+\frac{3}{8}x^2+\frac{1}{4}x'^2+....)。 \end{aligned} \quad (12)$$

のように展開される。

3.1 x の 1 次近似

式 (12) の右辺を x の 1 次で近似し、両辺を ϕ で積分すると、

$$\frac{dr_0}{dt} = -\frac{\Gamma}{r_0} + \frac{\bar{\eta}(t)}{\sqrt{r_0}} \quad (13)$$

$$\bar{\eta}(t) = \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} (1 - \frac{1}{2}x)\eta(\phi, t) \quad (14)$$

が得られ、 $\bar{\eta}(t)$ の相関は x の 1 次までで

$$\langle \bar{\eta}(t)\bar{\eta}(t') \rangle = 2\frac{\Gamma T}{2\pi\sigma}\delta(t-t') \quad (15)$$

となる。式 (13)、(15) はこれまでの仕事で解析されたものと同じで、^{1,4} x の 1 次まででは平均半径の運動はそれからのずれとは結合しない。

3.2 x の 2 次近似

さて、式 (12) の 2 次近似を用い、それを

$$a_n(t) \equiv \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{-in\phi} x(\phi, t) \quad (16)$$

$$\eta_n(t) \equiv \int_0^{2\pi} \frac{d\phi}{2\pi} e^{-in\phi} \eta(\phi, t) \quad (17)$$

で定義される x と η のフーリエ変換で表す。 $\eta_n(t)$ の相関は

$$\langle \eta_n^*(t)\eta_m(t') \rangle = 2\frac{\Gamma T}{2\pi\sigma}\delta(t-t')\delta_{n,m} \quad (18)$$

で与えられる。すると、運動方程式は、

$$\dot{r}_0 = -\frac{\Gamma}{r_0}\left\{1 - \sum_m (m^2 - 1)a_m a_{-m}\right\} + \frac{\zeta_0(t)}{\sqrt{r_0}} \quad (19)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(r_0 a_n) = & -\frac{\Gamma}{r_0}\left\{(n^2 - 1)a_n - \sum_m (m^2 + mn - 1)a_m a_{n-m}\right\} \\ & + \frac{\zeta_n(t)}{\sqrt{r_0}} \quad \text{for}(n \neq 0), \end{aligned} \quad (20)$$

となる。ここで

$$\zeta_n(t) \equiv \eta_n - \frac{1}{2} \sum_m \eta_{n-m} a_m + \sum_{n,l} \eta_{n-m-l} \left(\frac{3}{8} - \frac{1}{4}ml\right) a_m a_l \quad (21)$$

で、相関は a_n の 2 次までで

$$\begin{aligned} \langle \zeta_n^*(t)\zeta_m(t') \rangle = & 2\frac{\Gamma T}{2\pi\sigma}\delta(t-t')\left\{\delta_{n,m} - a_{m-n} \right. \\ & \left. + \sum_l \left(1 - \frac{1}{2}l(n-m-l)\right) a_l^* a_{m-n+l}\right\} \end{aligned} \quad (22)$$

となる。 \dot{r}_0 は、 r_0 の時間微分を表す。

この方程式は非線形結合している上に、ランダム力 $\zeta_n(t)$ には複雑な相関があるので、解析するのは容易ではない。解のおおよその振舞いを調べるために、以下のような一連の近似を行なおう。

まず、式 (20) で a_n の最低次のみを残す。

$$\frac{d}{dt}(r_0 a_n) = -\frac{\Gamma}{r_0}(n^2 - 1)a_n + \frac{\zeta_n(t)}{\sqrt{r_0}}. \quad (23)$$

次に、ランダム力 $\zeta_n(t)$ の間の相関を無視し

$$\langle \zeta_n^*(t) \zeta_m(t') \rangle = 2 \frac{\Gamma T}{2\pi\sigma} \delta(t - t') \delta_{n,m} \quad (24)$$

とする。最後に、平均半径のまわりの変形の緩和は一様な収縮よりもずっと速いということに注目して、式 (20) では r_0 を定数とみなし、式 (19) では、 $a_m a_{-m}$ をその平均 $\langle a_m a_{-m} \rangle$ で置き換えて両式を分離する。

その結果

$$\dot{r}_0 = -\frac{\Gamma}{r_0} \left\{ 1 - \sum_m (m^2 - 1) \langle |a_m|^2 \rangle \right\} + \frac{\zeta_0(t)}{\sqrt{r_0}} \quad (25)$$

$$\frac{1}{2} \langle |a_m|^2 \rangle = \frac{1}{2} \frac{1}{m^2 - 1} \frac{1}{r_0 \sigma} \frac{T}{2\pi} \quad (26)$$

を得る。式 (26) を式 (25) に代入し、格子定数を a とすると表面変形モードの数は $2\pi r_0/a$ となることを考慮すると、式 (25) は

$$\dot{r}_0 = -\frac{\Gamma_{eff}}{r_0} + \frac{\zeta_0(t)}{\sqrt{r_0}} \quad (27)$$

$$\Gamma_{eff} = \Gamma \left(1 - \frac{T}{2a\sigma} \right). \quad (28)$$

となる。式 (27) は、式 (13) の運動定数 Γ を有効運動定数 Γ_{eff} に置き換えることによって得られる。即ち、ここまでの近似の範囲内で、表面変形の効果は平均運動に関する限り有効運動定数の形で取り入れられる。

4 数値計算

上で用いた近似の有効性を確かめるために、式 (3) の数値シミュレーションを行なった。直交座標 $\vec{r}(s, t) = (x(s, t), y(s, t))$ ($0 \leq s \leq L$) で与えられる

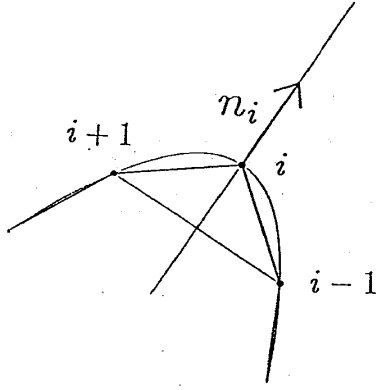


図 2: ドロプレットの界面の差分化とノーマルベクトル \vec{n}_i 。

ドロプレットに対して、

$$\vec{r}_i(t) = (x_i(t), y_i(t)) = (x(s_i, t), y(s_i, t)) \quad (29)$$

のように差分化する。ここで、 $s_i = iL/N$ 及び $N = \{L/a\}$ で、 a は長さの単位。また、 $\{L/a\}$ は L/a に最も近い整数を表すものとする。 $s = s_i$ での曲率は

$$K_i = \frac{1}{a} \frac{\Delta x_i \Delta^2 y_i - \Delta^2 x_i \Delta y_i}{(\Delta x_i)^2 + (\Delta y_i)^2}, \quad (30)$$

$$\Delta x_i = \frac{1}{2}(x_{i+1} - x_{i-1}), \quad \Delta^2 x_i = x_{i+1} + x_{i-1} - 2x_i, \text{ etc.} \quad (31)$$

のように近似される。ここで、時間の単位を t から $\tau \equiv \Gamma t$ に変えると、式 (3) は

$$\dot{\vec{r}}_i(\tau) = (-K_i(\tau) + \xi_i(\tau)) \vec{n}_i(\tau), \quad (32)$$

$$\vec{n}_i(\tau) \equiv \frac{1}{\sqrt{(\Delta x_i(\tau))^2 + (\Delta y_i(\tau))^2}} (\Delta y_i(\tau), -\Delta x_i(\tau)) \quad (33)$$

となる。(図 2)

ランダム力 $\xi(s, \tau)$ は

$$\xi_i(\tau) \equiv \frac{1}{\Gamma} \int_{s_i-a/2}^{s_i+a/2} \frac{ds}{a} \xi(s, \tau), \quad (34)$$

のように差分化されており、その相関は、

$$\langle \xi_i(\tau) \xi_j(\tau') \rangle = 2\theta \delta_{i,j} \delta(\tau - \tau'), \quad \theta \equiv \frac{T}{a\sigma} \quad (35)$$

で与えられる。式 (35) を見ると、系は無次元量 θ で特徴づけられていることが判る。さらに、式 (32)、(34) を時間について $\Delta\tau$ で差分化すると、

$$\vec{r}_{i,n+1} = \vec{r}_{i,n} + (-K_{i,n} \Delta\tau + \xi_{i,n}) \vec{n}_{i,n} \quad (36)$$

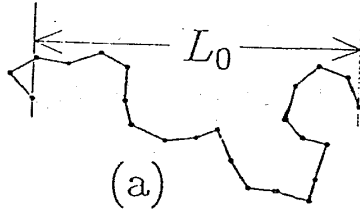


図 3:(a) L_0 だけ離れた 2 点間をつなぐ界面の典型的な形。(b) 比 L_0/L vs. θ 。

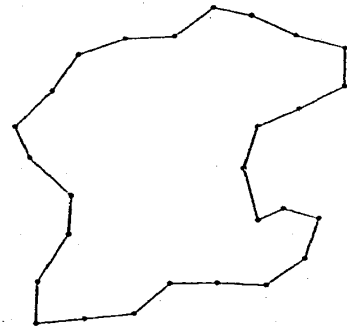
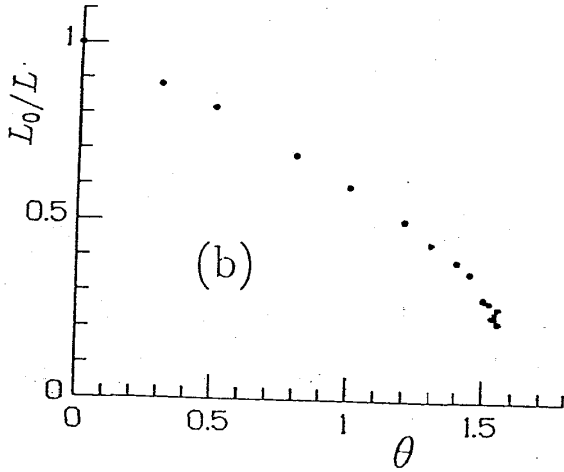


図 4: ドロプレットの典型的な形。

となる。ここで $\vec{r}_{i,n} \equiv \vec{r}_i(n\Delta t)$ etc. で、

$$\xi_{i,n} \equiv \int_{n\Delta\tau}^{(n+1)\Delta\tau} d\tau \xi_i(\tau) \quad (37)$$

$$\langle \xi_{i,n} \xi_{j,m} \rangle = 2\theta\Delta\tau \delta_{i,j} \delta_{n,m}. \quad (38)$$

実際のシミュレーションでは、周の長さに対応して分割点間の距離を一定に保つために、分点 $\vec{r}_{i,n}$ と分割数 N を、 $\Delta\tau = 0.01$ として、5 ステップごとに 3 次のスプライン関数を用いて再定義した。

まず最初に、 θ を変えたときの系の振舞いを見るために、2 点をつなぐ界面の長さ L の θ 依存性を見よう。(図 3) 2 点間の距離 L_0 は $10a$ ととってある。この模型の臨界温度 θ_c は 1.55 付近で、そこで、界面の長さは発散する。この値は、2 次元イジング模型の臨界温度 $T_c/j = 2.27$ と比較され、それは $a\sigma = 2J$ ととると $T_c/a\sigma = 1.13$ となる。

次に、円形の初期状態を用いてシミュレーションを行なった。図 4 に、シミュレーションにおける典型的なドロプレットの形を示す。図 5 には、 $\theta = 1.0$ で初期半径 R_0 を変えたときのドロプレットの生き残り確率 P が、実線で示されている。この計算では、ドロプレットはその面積が πa^2 より小さくなったとき消滅したとみなした。注目すべき点は次の 2 点である。(1) 生き残り確率の漸近的振舞いは、指数 $1/2$ の引き延ばされた指数関数型 $\exp(-c\tau^{1/2})$ で

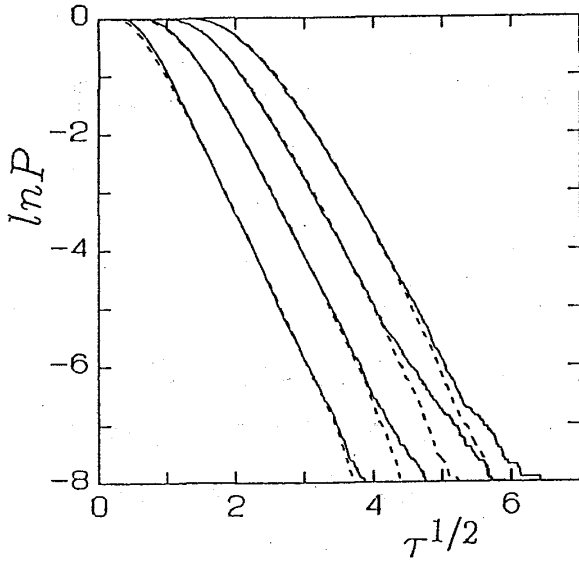


図 5: $\theta = 1$ で色々な R_0 の値に対する生き残り確率の対数 $\ln P$ vs. 時間の平方根 $\sqrt{\tau}$ 。初期半径 (R_0/a) は、左から 1.5, 2.0, 2.5, 3.0。実線は変形ドロプレット模型、破線は $\Gamma_{eff} = 0.68\Gamma$ のときの円形ドロプレット模型に対する結果。

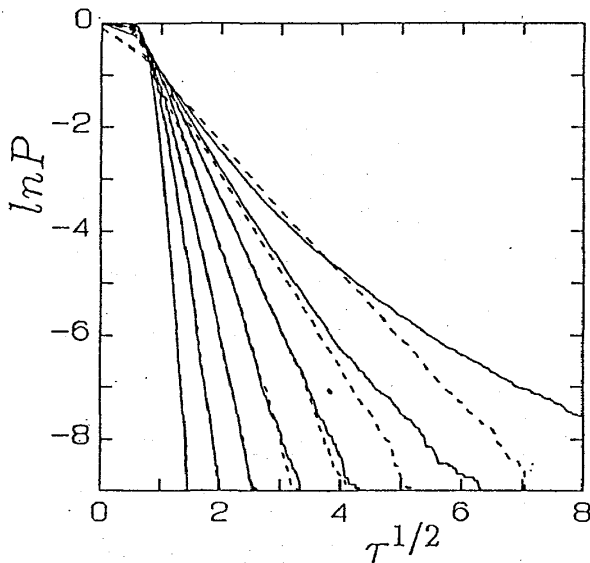


図 6: $R_0 = 1.5a$ で色々な θ の値に対する生き残り確率の対数 $\ln P$ vs. 時間の平方根 $\sqrt{\tau}$ 。変数 θ は、左から 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0, 1.2, 1.4。実線は変形ドロプレット模型、破線は左より $\Gamma_{eff}/\Gamma = 1.0, 0.92, 0.85, 0.76, 0.68, 0.62, 0.50$ のときの円形ドロプレット模型に対する結果。

ある。(2) 漸近領域の傾きは、ドロプレットの初期半径によらない。即ち、 c は R_0 によらない。どちらも、円形ドロプレット模型の特徴と全く同じである。⁴ 図 5 中に、おなじ初期半径で $\Gamma_{eff} = 0.68\Gamma$ を用いた円形ドロプレット模型式 (27) のシミュレーションの結果も、破線で示した。その計算では、ドロプレットは $r_0 < a$ となったとき消滅したとした。2つのデータが事実上重なるということより、生き残り確率への変形効果は、円形模型に於て有効運動定数の形で取り入れられるということは、明らかである。

図 6 に、 $R_0 = 1.5a$ の下で、いろいろな温度 θ での生き残り確率を実線で、対応する Γ_{eff} を用いた円形模型の結果 (破線) とともに示した。二組のデータは、一般的によく一致しているが、 $\theta = 1.2$ と 1.4 のデータはうまく重ならな

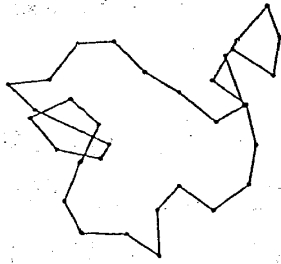


図 7: $\theta = 1.4$ のときのドロプレットの典型的な形。

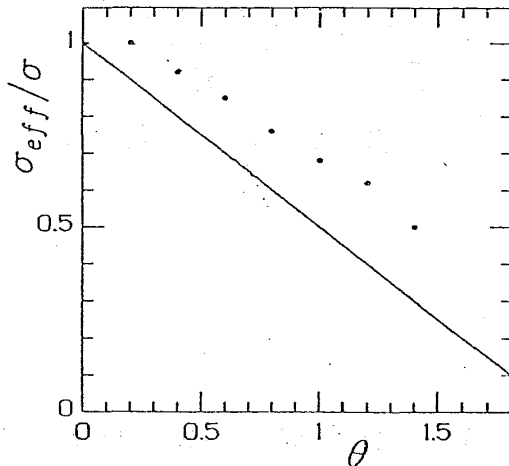


図 8: Γ_{eff}/Γ vs. θ . 黒丸は図 6 よりのデータ。 $\theta = 1.2$ および 1.4 のデータは誤差が大きい。実線は式 (28) の Γ_{eff}/Γ 。

い。その理由は、この温度領域ではドロプレットの形があまりにも波打ちすぎて、しばしば界面が自分自身と交差してしまうためと思われる。(図 7) この温度領域では、界面模型の有効性自体も疑わしく、また、分点を再定義する手順にもあいまいさが生ずる。実際、ドロプレットの運動はこの温度領域では分点をどのように内挿したかに依存してしまう。

図 8 に、上のシミュレーションによって決められた Γ_{eff} の温度依存性を、式 (28) の Γ_{eff} とともに示した。両者の一致はそんなに悪くはないが、差は $\theta \rightarrow 0$ で小さくはなっていない。これは、変形モード間の相関が無視できないということを示しているのかも知れない。

5 まとめ

ドロプレットの生き残り確率に対するその変形の効果を調べるために、界面の方程式を解析的及び数値的に調べた。この模型に於て、独立なパラメータは θ であり、臨界値 θ_c で固定された 2 点を結ぶ界面の長さは発散することが示された。式 (3)、(4) にはあらわには示されてはいないが、この模型には最小の長さのスケールが必要であることには、注意すべきである。

1.2 よりも小さな θ に対しては、生き残り確率に対するドロプレットの変形効果は有効運動定数 Γ_{eff} の形でよく取り込めることが示された。一方、それ

より大きな θ に対しては、この模型は、界面が自分自身と交差するために、よくない。数値的手順の正当性も、高温では最小波長の変形が起こるため疑わしくなり、ドロプレットの運動自体が分点の内挿法に依存し始める。界面の方程式 (3) も、十分低温に対して導かれたものであることにも、注意すべきであろう。⁶

有効運動係数 Γ_{eff} について、少しコメントを加える。式 (24) と (27) で時間スケールを $\tau \equiv \Gamma_{eff} t$ のようにすると、

$$\frac{d}{d\tau} r_0 = -\frac{1}{r_0} + \frac{\zeta_0(\tau)}{\sqrt{r_0}}, \quad (39)$$

$$\langle \zeta_0^*(\tau) \zeta_0(\tau') \rangle = 2 \frac{\Gamma T}{2\pi\alpha\sigma} \delta(\tau - \tau'), \quad \alpha \equiv \Gamma_{eff}/\Gamma. \quad (40)$$

となる。式 (40) の形を見ると、表面張力が α 倍だけ、界面の揺らぎで小さくなったと解釈できる。しかしながら、このような動的な方法によって定義された有効表面張力 $\sigma_{eff} = \alpha\sigma$ と熱力学的表面張力との関係は、自明ではない。

結論として、ドロプレットの界面模型が有効であるパラメータ領域では、ドロプレットの生き残り確率に変形効果は重要な役割を果たさず、スピン自己相関関数を計算するのに用いられた球形ドロプレットの仮定は、悪くはないようである。

参考文献

1. D.A.Huse and D.S.Fisher, Phys. Rev. B **35**, 6841 (1987).
2. H.Takano, H.Nakanishi, and S.Miyashita, Phys. Rev. B **37**, 3716 (1988)
3. A.T.Ogielski, Phys. Rev. B **36**, 7315 (1987).
4. C.Tang, H.Nakanishi, and J.S.Langer, Phys. Rev. A **40**, 995 (1989).
5. H.Nakanishi, Phys. Rev. A, (1990), to be published.
6. K.Kawasaki and T.Ohta, Prog. Theor. Phys. **67**, 147 (1982).